Ejemplo: el oscilador armónico sometido a una fuerza constante

Para ver cómo se aplica la teoría de perturbaciones para resolver de forma aproximada un problema de autovalores del hamiltoniano que no se pueda resolver de forma analítica, vamos a comenzar con un caso sencillo y se trata de un oscilador armónico al que le vamos a añadir un término lineal.

Supongamos que queremos encontrar los estados estacionarios para una partícula que está descrita mediante el siguiente hamiltoniano:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 + \alpha\hat{x}$$

donde α es una constante real. Podría ser por ejemplo el caso de un oscilador armónico para una partícula cargada en un campo eléctrico uniforme. En este caso se puede encontrar una solución analítica si completamos el cuadrado:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(\hat{x}^2 + 2\frac{\alpha}{m\omega^2}\hat{x}\right) = \\ &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(\hat{x} + \frac{\alpha}{m\omega^2}\right)^2 - \frac{1}{2}\frac{\alpha^2}{m\omega^2}\end{aligned}$$

Por tanto, tenemos otro oscilador armónico simple pero con una energía menor, de modo que las energías de los estados estacionarios son:

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{2}\frac{\alpha^2}{m\omega^2}$$

Por otro lado, la partícula oscila en torno al punto $x = -\alpha/m\omega^2$, de modo que las autofunciones son:

$$\psi_n(x) = \varphi_n(x + \frac{\alpha}{m\omega^2}) = e^{i\hat{p}\alpha/\hbar m\omega^2}\varphi_n(x)$$

(donde $\varphi_n(x)$ son las autofunciones del oscilador armónico) o bien en notación de Dirac:

$$|\psi_n\rangle = e^{i\hat{p}\alpha/\hbar m\omega^2}|\varphi_n\rangle = e^{\alpha\left(a-a^\dagger\right)/\omega\sqrt{2m\hbar\omega}}|\varphi_n\rangle$$

Podemos desarrollar en serie de potencias α y el primer término será:

$$|\psi_n\rangle = |\varphi_n\rangle + \frac{\alpha}{\omega}\sqrt{\frac{n}{2m\hbar\omega}}|\varphi_{n-1}\rangle - \frac{\alpha}{\omega}\sqrt{\frac{n+1}{2m\hbar\omega}}|\varphi_{n+1}\rangle + \cdots$$

Vamos a ver a continuación que la teoría de perturbaciones nos permite reproducir estos resultados. El hamiltoniano lo podemos escribir como una suma de dos términos:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$$

donde:

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \qquad \text{y} \qquad \hat{W} = \alpha\hat{x}$$

El hamiltoniano $\hat{H}_0$ es el del oscilador armónico simple, de modo que ya sabemos que el espectro es no degenerado y está constituido por las energías:

$$E_n^0 = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Los autovectores correspondientes los notaremos por $|\varphi_n^0\rangle = |\varphi_n\rangle$, que son los autovectores del oscilador armónico simple. Podemos escribir el término $\hat{W}$ del hamiltoniano en función de los operadores de creación y aniquilación como sigue:

$$\hat{W} = \alpha\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(a^\dagger + a\right)$$

Vamos a obtener en primer lugar la corrección de primer orden de la energía, que viene dada por la expresión:

$$\varepsilon_{1n} = \left\langle \varphi_n^0 \left| \hat{W} \right| \varphi_n^0 \right\rangle = \alpha\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left\langle \varphi_n \left| \left(a^\dagger + a\right) \right| \varphi_n \right\rangle = 0$$

Por tanto, la corrección en primer orden es nula. Vamos a calcular a continuación la corrección en primer orden de los autovectores, que viene dada por:

$$|1_n\rangle = {\sum_m}' \frac{\left\langle \varphi_m \left| \hat{W} \right| \varphi_n \right\rangle}{E_n^0 - E_m^0}|\varphi_m\rangle$$

Necesitamos calcular los elementos de matriz del operador $\hat{W}$:

$$\begin{aligned}
\left\langle \varphi_m \left| \hat{W} \right| \varphi_n \right\rangle &= \alpha\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left\langle \varphi_m \left| \left(a^\dagger + a\right) \right| \varphi_n \right\rangle = \alpha\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left[\left\langle \varphi_m \left| a^\dagger \right| \varphi_n \right\rangle + \left\langle \varphi_m \left| a \right| \varphi_n \right\rangle\right] = \\
&= \alpha\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} + \sqrt{n}\delta_{m,n-1}\right)
\end{aligned}$$

Por otro lado, en el denominador tenemos:

$$E_n^0 - E_m^0 = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) - \hbar\omega\left(m + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(n - m\right)$$

Introducimos estos resultados en el sumatorio:

$$\begin{aligned}
|1_n\rangle &= {\sum_m}' \alpha\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{1}{\hbar\omega}\left(\frac{\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}|\varphi_m\rangle}{n-m} + \frac{\sqrt{n}\delta_{m,n-1}|\varphi_m\rangle}{n-m}\right) = \\
&= \frac{\alpha}{\omega}\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left(\frac{\sqrt{n+1}}{n-n-1}\left|\varphi_{n+1}\right\rangle + \frac{\sqrt{n}}{n-n+1}\left|\varphi_{n-1}\right\rangle\right) = \\
&= \frac{\alpha}{\omega}\sqrt{\frac{n}{2m\hbar\omega}}\left|\varphi_{n-1}\right\rangle - \frac{\alpha}{\omega}\sqrt{\frac{n+1}{2m\hbar\omega}}\left|\varphi_{n+1}\right\rangle
\end{aligned}$$

Por tanto, hasta primer orden los autovectores del hamiltoniano $\hat{H}$ vienen dador por:

$$|\psi_n\rangle = |\varphi_n\rangle + \frac{\alpha}{\omega}\sqrt{\frac{n}{2m\hbar\omega}}\left|\varphi_{n-1}\right\rangle - \frac{\alpha}{\omega}\sqrt{\frac{n+1}{2m\hbar\omega}}\left|\varphi_{n+1}\right\rangle + \cdots$$

Podemos comprobar que coincide con la expresión obtenida anteriormente de forma analítica. Vamos a calcular a continuación la corrección de la energía de segundo orden, que viene dada por la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{2n} &= \left\langle \varphi_n \left| \hat{W} \right| 1_n \right\rangle = \langle \varphi_n | \hat{W} \left(\frac{\alpha}{\omega}\sqrt{\frac{n}{2m\hbar\omega}} \left| \varphi_{n-1} \right\rangle - \frac{\alpha}{\omega}\sqrt{\frac{n+1}{2m\hbar\omega}} \left| \varphi_{n+1} \right\rangle \right) = \\
&= \alpha\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{\alpha}{\omega} \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \left(\sqrt{n} \left\langle \varphi_n \left| \left(a^\dagger + a \right) \right| \varphi_{n-1} \right\rangle - \sqrt{n+1} \left\langle \varphi_n \left| a^\dagger + a \right| \varphi_{n+1} \right\rangle \right) = \\
&= \frac{\alpha^2}{2m\omega^2} \left(\sqrt{n} \left\langle \varphi_n \left| a^\dagger \right| \varphi_{n-1} \right\rangle - \sqrt{n+1} \left\langle \varphi_n \left| a \right| \varphi_{n+1} \right\rangle \right) = \\
&= \frac{\alpha^2}{2m\omega^2} \left(\sqrt{n}\sqrt{n} - \sqrt{n+1}\sqrt{n+1} \right) = -\frac{\alpha^2}{2m\omega^2}
\end{aligned}$$

Por tanto la energía hasta segundo orden viene dada por:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{\alpha^2}{2m\omega^2}$$

que se puede comprobar que coincide con el resultado analítico encontrado anteriormente.

El aplicar la teoría de perturbaciones al caso anterior no tiene mucho sentido ya que es un problema que se puede resolver analíticamente. Sin embargo, nos ha servido como un ejemplo de cómo se aplica la teoría de pertubaciones y además hemos podido comprobar la validez del método, ya que los resultados encontrados han coincidido con los resultados analíticos.